

- В.С. Харченко и А.А. Орехова. – Харьков : Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», 2007. – 197 с.
5. ST7LITE2. 8-bit microcontroller with single voltage flash memory, data EEPROM, ADC, timers, SPI. Rev. 4. July 2006. – Режим доступа : <http://www.st.com>.
  6. ST7 family. Programming manual. Rev. 2. November 2005. – Режим доступа : <http://www.st.com>.
  7. ST Visual Develop. – Режим доступа : <http://www.st.com/mcu/contentid-44-15-STVD.html>
  8. ST7/ST5 training board. User guide. Rev. 1.0. March 2005. – 12 p.

**Мизгулин В.В., Гольдштейн С.Л., Каменцев С.А.**

**Mizgulin V.V., Goldstein S.L., Kamentsev S.A.**

**УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС "МНОГОМАСШТАБНОЕ  
МОДЕЛИРОВАНИЕ В НАНОТЕХНОЛОГИЯХ"**

**THE METHODOICAL COMPLEX «MULTISCALE MODELING IN  
NANOTECHNOLOGY»**

*mizgulin@gmail.com*

*ГОУ ВПО «Уральский государственный технический университет –  
УПИ имени первого Президента России Б.Н.Ельцина»  
г. Екатеринбург*

*Разработан учебно-методический комплекс для многомасштабного моделирования в нанотехнологиях. Комплекс использует современные информационные технологии. Особенностью комплекса является направленность на расширение функциональности и использование когнитивных технологий.*

*The methodical complex was developed for multiscale modeling in nanotechnology. The complex uses modern info-technologies. Main features of the complex are the extensibility and cogno-technologies employment.*

### **Актуальность и постановка задачи**

Инициатива президента Российской Федерации «Стратегия развития nanoиндустрии» от 24 апреля 2007 года повлекла за собой резкие перемены в образовательной сфере. В настоящее время существует глобальная программа создания Национальной Нанотехнологической Сети (ННС), в которой принимают участие ведущие вузы страны [1].

Возникший за рубежом процесс интеграции нано-, био-, инфо- и когнитивных технологий, называемый NBIC-конвергенцией [2], предоставил возможность оптимизации работ в смежных областях науки для получения продукции нового качества. Использование передовых информационных и когнитивных технологий в зарождающейся отрасли нанотехнологий является необходимым условием ее развития.

Одной из основных проблем в развитии любой новой отрасли является подготовка кадров. Кризисная ситуация в экономике способствует постоянному увеличению безработных граждан. Пропускной способности учебного

## Секция 2

оборудования, имеющегося в университетах, не достаточно для обслуживания большого числа студентов. Чтобы задействовать их в области нанотехнологий, требуется учебно-методический комплекс (далее – комплекс), предоставляющий необходимые знания по различным специальностям, а также формирующий базовые навыки. Для создания такого комплекса целесообразно использовать информационные «портальные» технологии, а также когнитивные технологии организации баз знаний.

### Предпосылки

На сегодняшний день в Интернете имеется множество образовательных ресурсов по нанотехнологиям, некоторые из которых являются учебно-методическими комплексами. Российские ресурсы можно разделить на две основные категории: обще-информационные [3] и узкопрофильные [4]. За рубежом чаще встречаются инструментальные ресурсы [5]. Наиболее полным и функциональным ресурсом является портал «nanoHUB» [6], совмещающий возможности общеинформационных, узкопрофильных и инструментальных ресурсов, а также предоставляющий возможность общения и обмена опытом. Будем использовать портал «nanoHUB» в качестве прототипа комплекса. В таблице 1 приведена критика прототипа.

Таблица 1 – Достоинства и недостатки прототипа [6]

Достоинства	Недостатки
<ul style="list-style-type: none"><li>- интеллектуальная поддержка,</li><li>- многопрофильность,</li><li>- инструментарий моделирования,</li><li>- возможность коммуникаций.</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>- теоретические курсы не связаны с инструментарием,</li><li>- сложная навигация,</li><li>- ориентированность инструментария на технологию java,</li><li>- нет интеграции инструментариев.</li></ul>

### Концептуальная модель комплекса

Комплекс описан в формализме модификационной концептуальной модели на основе базово-урвневой концептуальной модели «Портала» [7].

Комплекс выполняет функции:

- многомасштабного моделирования;
- системной интеграции;
- проведения вычислительных экспериментов через сеть с распараллеливанием вычислений;
- обеспечения доступа пользователей к мощному серверу приложений;
- хранения результатов многомасштабного моделирования в единой иерархически структурированной базе данных;
- интеллектуальной поддержки отдельных модулей методическими материалами;
- предоставления общей интеллектуальной поддержки в области нанотехнологий;

в качестве структурной основы используются методическое, информационное, программное, аппаратное обеспечение; на базе технологий:

- сетевые технологии: Экстранет, Интранет, Интернет;

- веб-технологии: HTML, XML, ASP MVC, Java;
- технологии работы с данными и знаниями;
- технологии распараллеливания вычислений;

где направленность функционирования Комплекса:

- эффективное взаимодействие студентов, преподавателей и исследователей в области нанотехнологий;
- эффективное использование вычислительного комплекса;
- комплексная интеллектуальная поддержка в области нанотехнологий;
- использование когнитивных технологий;
- расширение возможностей комплекса, путем подключения дополнительных модулей;

с целью развития научно-технического потенциала по приоритетным направлениям развития науки, технологий и техники.

### Архитектура комплекса

Поставленные перед комплексом задачи потребовали гибкой расширяемой структуры, организации многопользовательского доступа, отказоустойчивости, больших объемов памяти, вычислительных мощностей и надежных средств защиты информации. Одним из главных достоинств комплекса является открытость интеграционной платформы. В него могут быть встроены не потерявшие актуальность научные программы по моделированию, не используемые по причине устаревания требуемой среды.

Архитектура комплекса является клиент-серверной. Требования к клиентской стороне минимальны и заключаются в поддержке современных Интернет-браузеров. Серверная часть состоит из трех блоков: веб-сервер, сервер БД и БЗ, сервер приложений. На рисунке представлена схема архитектуры комплекса.



Рисунок. Архитектура комплекса

### Состояние и перспективы развития комплекса

Учебно-методический комплекс «Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях» разработан в рамках выполнения Государственного контракта № 02.523.11.3014 от 26 августа 2008 года. На данный момент комплекс проходит предварительные испытания в Учреждении Российской академии наук Центре фотохимии РАН. Планируется дальнейшее распространение комплекса по направлениям:

- моделирование хемосенсоров;
- виртуальные приборы;
- моделирование наноструктурированных материалов.

Использование информационных и когнитивных технологий для развития нанотехнологической отрасли позволяют:

- увеличить пропускную способность образовательной системы;
- сократить затраты на использование дорогостоящего оборудования;
- предоставить общий доступ к образовательным ресурсам по нанотехнологиям;
- восстановить устаревшие программы, не потерявшие научную актуальность.

### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК:

1. Официальный сайт «Национальная нанотехнологическая сеть» [Электронный ресурс]. – Электрон.дан. – Режим доступа: <http://www.rusnanonet.ru>, свободный.
2. Converging technologies for improving human performance nanotechnology, biotechnology, information technology and cognitive science [Электронный ресурс]. – Электрон.дан. – Режим доступа: [http://www.wtec.org/ConvergingTechnologies/Report/NBIC\\_report.pdf](http://www.wtec.org/ConvergingTechnologies/Report/NBIC_report.pdf), свободный.
3. Спецификация учебно-методического комплекса «Нанотехнологии и их применение в электронике, электротехнике и водородной энергетике» [Электронный ресурс]. – Электрон.дан. – Режим доступа: <http://ctl.mpei.ru/pdfs/000467.pdf>, свободный.
4. Учебно-методический комплекс «Введение в нанотехнологии» [Электронный ресурс]. – Электрон.дан. – Режим доступа: <http://edu.ulsu.ru/w/>, свободный.
5. NIH Research Resource Center for the Development of Multiscale Modeling Tools for Structural Biology [Электронный ресурс]. – Электрон.дан. – Режим доступа: <http://mmtsb.org>, свободный.
6. Официальный сайт «nanHUB.org» [Электронный ресурс]. – Электрон.дан. – Режим доступа: <http://www.nanohub.org>, свободный.
7. С.Л. Гольдштейн. Системная интеграция бизнеса, интеллекта, компьютера. Книга 1: введение в проблематику и постановку задач: учебное пособие. - Екатеринбург: ИД «ПироговЪ», 2006. – С. 392.